

действий  $B - B$   $\epsilon_{BB} = 0.3$ , а перекрестное взаимодействие  $\epsilon_{AB} = 0.65$ . Приведенная температура в системе варьировалась от 0.1 до 5.0.

Для сравнения были определены условия перехода клубок – глобула в гомополимере со значением энергетического параметра  $\epsilon = 1.0$ ;  $\epsilon = 0.65$  и  $\epsilon = 0.30$ . В процессе моделирования рассчитывались геометрические характеристики цепи  $\langle S^2 \rangle$ ,  $\langle R^2 \rangle$ , компоненты тензора инерции полимерной молекулы, а также спэны. Кроме того, рассчитывались внутримолекулярный структурный фактор (форм-фактор) и функция радиального распределения плотности относительно центра инерции макромолекулы.

## КОЛЛАПС ОДИНОЧНОЙ ЦЕПИ РЕГУЛЯРНОГО СОПОЛИМЕРА С РАЗЛИЧНОЙ ЖЕСТКОСТЬЮ БЛОКОВ

*Нератова И.В., Темникова С.А.*

Тверской государственный университет

Методом броуновской динамики выполнено моделирование процесса формирования глобулярного состояния одиночной цепи регулярного сополимера при постоянной температуре  $T=1,0$ . Цепь представлена чередующимися сегментами двух видов жесткости (жесткими (**A**) и гибкими (**B**)) одинаковой длины с различным сродством к растворителю. В предложенной модели длина звеньев сорта *A* и *B* варьировалась в пределах от 9 до 30. Общая длина цепи *N* также принимала различные значения.

Расчеты проводились как для случая плохого растворителя для жестких фрагментов цепи и хорошего для гибких, так и для случая плохого растворителя для гибких фрагментов. Качество растворителя моделировалось изменением энергии взаимодействия между отдельными звеньями полимерной цепи. Растворитель характеризуется вязкостью среды  $\eta=0,5$ .

Невалентные взаимодействия мономерных звеньев описывались потенциалом Леннарда-Джонса с радиусом обрезки  $4,5\sigma$ . Полная потенциальная энергия системы определялась как сумма всех видов энергий взаимодействия между силовыми центрами цепи.

Начальные конфигурации цепи генерировались методом случайных блужданий без самопересечений на кубической решетке и уравнивались в течение  $\sim 3 \cdot 10^6$  шагов интегрирования. Во время режима релаксации условие хорошего растворителя выполнялось для всех силовых центров цепи. Переход в равновесное состояние определялся по стабилизации потенциальной энергии системы и отсутствию дрейфа размеров макромолекулы на достаточно больших временных интервалах. Для ка-

ждого набора параметров цепи проводилось усреднение на серии из 10 расчетов. Кроме этого, усреднение проводилось и по начальным состояниям системы. Длительность вычислений в рабочем режиме, в зависимости от длины цепи, составляла  $3 \cdot 10^6 - 10 \cdot 10^6 \Delta t$  шагов.

Расчеты показали, что конечные конформации цепи напрямую зависят от длины образующих ее сегментов и от общей длины цепи. Мы наблюдали образование высокоупорядоченных структур (пачек) при возрастании длины жестких блоков. С увеличением общей длины цепи конечное состояние характеризовалось образованием нескольких блоков, стабилизированных гидрофильной опушкой.

## ГАЗОВЫЙ СЕНСОР НА АММИАК НА ОСНОВЕ НОВОГО ЭЛЕКТРОПРОВОДНОГО ПОЛИМЕРА ПОЛИ(N-ФЕНИЛГЛИЦИНА)

*Холощенко Н.М.*

Тверской государственный университет

Электропроводные полимеры (ЭПП) являются весьма перспективными материалами для изготовления сенсоров того или иного рода, чувствительных к разнообразным компонентам, находящимся в растворе или газовой фазе, т.е. в таком состоянии, которое бы позволяло беспрепятственно воздействовать на ЭПП-пленку, вызывая, тем самым, скачок потенциала в измерительной схеме.

При изготовлении рабочего тела газового сенсора в качестве чувствительного элемента была использована пленка из нового ЭПП поли(N-

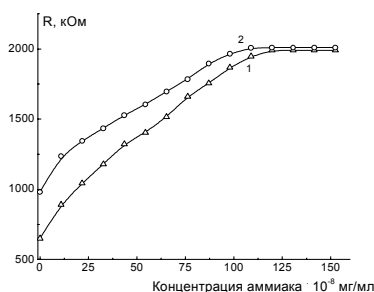


Рис.1. Зависимость сопротивления пленки поли(N-фенилглицина) от концентрации аммиака:  
1 – при 20°C; 2 – при 50°C.

Относительная влажность <1 %.

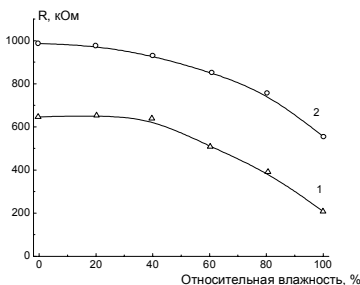


Рис.2. Зависимость сопротивления пленки поли(N-фенилглицина) от относительной влажности воздуха:  
1 – при 20°C; 2 – при 50°C.

Концентрация аммиака  $5,44 \cdot 10^{-8}$  мг/мл.

фенилглицина), синтез и свойства которого описаны в [1]. Было показано, что порог обнаружения нашего сенсора (около 20 ppb) значительно